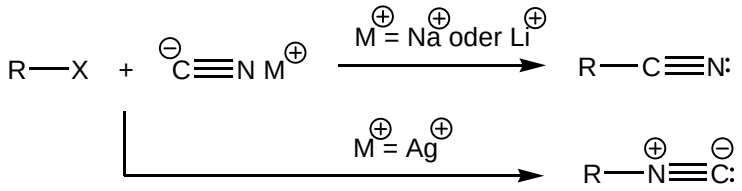
1. Gruppe: Nucleophile Substitution



Prinzip der harten und weichen Säuren und Basen (Pearson): HSAB

Klopman Gleichung:

$$\Delta E = -\underbrace{\frac{q_s q_t}{\Sigma R_{st}}}_{\text{elektrostatischer Teil}} + \underbrace{2\sum_{\substack{\text{occupied}\\ \text{orbitals m}\\ \text{of s}}} \sum_{\substack{\text{unoccupied}\\ \text{orbitals n}\\ \text{of molecule T}}} \frac{(c_s^m c_t^n \Delta\beta_{st})^2}{E_m^* - E_n}}_{\text{kovalenter Teil}}$$

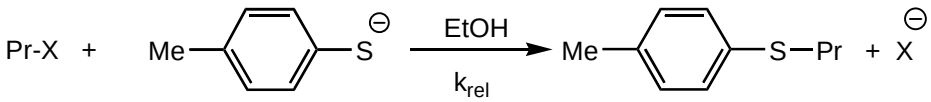
Pearson's Hard-Soft Prinzip:

Harte Säuren:	H^+, Li^+, BF_3, CO_2, SO_3
Grenzfälle:	R_3C^+, BR_3, Zn^{2+}, SO_2, Cu^{2+}
Weiche Säuren:	RS^+, $^{\bullet}CH_2$, Pd^{2+}, Hg^{2+}, I^+, I_2
Harte Basen:	F^-, Cl^-, RO^-, ROH, R_2O, NH_3, N_2H_4, RNH_2, SO_4^{2-}, CO_3^{2-}, RCO_2^-, NO_3^-
Grenzfälle:	Br^-, SO_3^{2-}, NO_2^-, Ph-NH_2, Py, N_3^-
Weiche Basen:	H^-, I^-, RS^-, RSH, R_2S, R_2Se, SCN^-, R_3P, $CH_2{=}CH_2$, CN^-, CO, R_3C^-

Hart reagiert bevorzugt mit hart

Weich reagiert bevorzugt mit weich

2.2.3 Die austretende Gruppe:

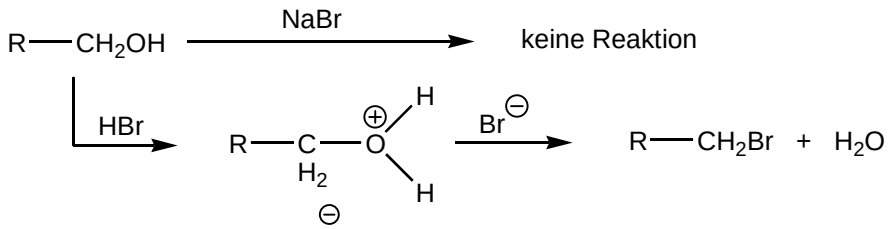
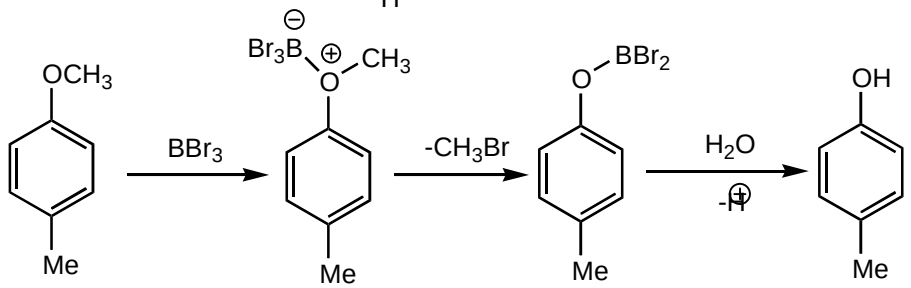


X	k_{rel}
I	1
Br	0.29
Cl	0.0007
OTs	0.12

Schlechte Abgangsgruppen: $OH^{\ominus}$, $NR_2^{\ominus}$, $OR^{\ominus}$, $N_3^{\ominus}$ (meistens starke Basen)

gute Abgangsgruppen: $I^{\ominus}$, $Br^{\ominus}$, $Cl^{\ominus}$, SR_2, NR_3, $RSO_3^{\ominus}$, $CF_3SO_3^{\ominus}$, $C_4F_9SO_3^{\ominus}$

Bsp.:



Bsp.: